散逸系における秩序形成の力学モデル(基研長期研究計画「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告,研究会報告)

菅野, 礼司

散逸系における秩序形成の力学モデル

大阪市大・理　菅　野　礼　司

§I　序

散逸系における秩序形成の理論は，主としてエントロピー減少や synergy 現象（協同現象）という観点から，個々の構成要素の運動を記述するのでなく，coarse graining や統計平均によってその系をマクロ的に考察するものであった．これとは別の観点から，個々の構成要素の運動に着目するならば，無秩序な物質系から秩序系が形成されるということは，力学的には広い意味で，ランダムな自由度が減少し，拘束条件の強い系への移行とみなせる．すなわち，拘束条件が時間発展とともに形成され，成長する過程とみなしうる．

この報告では，そのような散逸系を拘束系の力学として，つまり構成要素に対する拘束条件が自ら生成される力学として考察し，その可能性を示す．そして，そのような単純モデルを提示する．このモデルは realistic とはいえないが，解析的に解けて構成要素の時間発展を見ることができるので，秩序形成過程における機構の解明と新たな概念の導出に役立つであろう．

§IIでは，Dirac の拘束力学系の理論[1)]を用いて，散逸的拘束系の質点力学の一般論を展開し，時間的に変化する拘束条件によってある種の秩序が力学的に形成される理論の可能性を考察する．§IIIではその秩序形成を示す拘束力学系のモデル Hamiltonian の具体例を２，３提示する．それらはオモチャのモデルではあるが，典型的特徴を示す興味あるものである．その解析的解を求めることにより秩序形成過程の時間的発展をみる．

§II　拘束系の力学と秩序形成

自由度 N の質点系を記述する力学変数を $q_i\,(i=1\sim N)$ とし，その Lagrangian を

$$L(q,\ \dot{q},\ t)\equiv L(q_1,\ \cdots\cdots,\ q_N,\ \dot{q}_1,\ \cdots\cdots\dot{q}_N,\ t)\qquad (\dot{q}_i\equiv\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t})$$

で表わす．散逸系であるため，L は時間 t を陽に含む．拘束条件は，外から与える外的拘束条件があるが，それとは別に，L の性質によってその力学系の中に必然的に含まれる内的拘束条件がある．秩序形成の理論としては内的拘束条件のある力学系の方が適切である．

内的拘束系の力学をシステマティックに扱う方法はDiracによって定式化された.[1] 以下にその必要な部分の概要を述べる．内的拘束条件はHessian 行列

$$A_{ij} \equiv \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \tag{2.1}$$

が特異的，つまり $\det(A_{ij}) = 0$ のときに現われる．この行列 A_{ij} の階数を $N-A$ とすると，q_i に共役な運動量

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q,\ \dot{q},\ t) \tag{2.2}$$

は，$\partial p_i/\partial \dot{q}_i = A_{ij}$ が特異的であるために A 個の p_i は $\dot{q}_j$ にかんして独立関数ではなく，$N-A$ 個のみ独立である．それゆえ，A 個の拘束条件

$$\phi_\alpha{}^1(q,\ p,\ t) = 0 \qquad (\alpha = 1 \sim A) \tag{2.3}$$

が存在する．(2.3)は位相空間での条件で第1次拘束条件（primary constraint）と呼ばれる．$\phi_\alpha{}^1$ の右肩の1は「第1次」を意味する．

Diracに従って，拘束条件（2.3）を弱等式（≈ 0）として扱う．すなわち，Poisson括弧（P.B.）などの計算の途中では，すべての p_i を独立変数のように扱い，最後に（2.3）を要請することにする．そうすると，この力学系の時間発展を与えるHamiltonianは

$$H_T = H(q,\ p,\ t) + \sum_{\alpha=1}^{A} v_\alpha \phi_\alpha{}^1(q,\ p,\ t) \tag{2.4}$$

で表わされる．ここに $H(q,\ p,\ t)$ は正準Hamiltonianで，$\sum p_i \dot{q}_i - L$ において，$\phi_\alpha{}^1 = 0$ としたものである．H_T をtotal Hamiltonianという．v_α はLagrangeの未定因子で，弱等式

$$\phi_\alpha{}^1(q,\ p,\ t) \approx 0 \qquad (\alpha = 1 \sim A) \tag{2.5}$$

のために現われる．

H_T により生成されるHamiltonianの運動方程式は

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H_T}{\partial p_i} \approx \frac{\partial H}{\partial p_i} + \sum v_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha{}^1}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H_T}{\partial q_i} \equiv -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \sum v_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha{}^1}{\partial q_i} \end{aligned}\right\} \tag{2.6}$$

となる．$\partial v_\alpha/\partial p_i$, $\partial v_\alpha/\partial q_i$ の項は（2.5）により落ちる．拘束条件（2.5）のもとで，（2.6）が積分可能であるためには，（2.5）が任意の時刻で成立すること，すなわち，運動方程式のもとで定常的でなければならない；

$$\dot{\phi}_\alpha{}^1 = \frac{\partial \phi_\alpha{}^1}{\partial t} + \{\phi_\alpha{}^1,\ H\} + \sum v_\beta \{\phi_\alpha{}^1,\ \phi_\beta{}^1\} \equiv 0 \quad \mathrm{mod}(\phi^1). \tag{2.7}$$

{ , }はP.B. を表わす．もし v_β をうまく選ぶことで，もし（2.7）が充されるならば，

(2.5) と (2.6) は整合的で解をもつ．もし充されなければ，(2.7) を改めて ≈ 0 とおいて，2次的拘束条件を要請しなければならない；

$$\phi_\alpha^2(q,\ p,\ t) \equiv \frac{\partial \phi_\alpha^1}{\partial t} + \{\phi_\alpha^1,\ H\} \approx 0 \tag{2.8}$$

(2.7) が充されない場合というのは，$\det\{\phi_\alpha^1,\ \phi_\beta^1\} \approx 0$ で $\{\phi_\alpha^1,\ \phi_\beta^1\}$ の逆行列が弱等式のもとで存在しないときである．ϕ_α^2 の数は A より少くないこともある（$\{\phi_\alpha^1,\ \phi_\beta^1\}$ の階数だけ A より減少する）．

(2.8) の ϕ_α^2 もまた定常条件を充さねばならない．(2.7) で未定のまま残った v_β^1 をうまく選んでも

$$\dot{\phi}_\alpha^2(q,\ p,\ t) \equiv 0 \quad \mathrm{mod}(\phi^1,\ \phi^2) \tag{2.9}$$

が充されなければ，新たな拘束条件 $\phi_\alpha^3 \approx 0$ が現われる．この手続きを繰り返し，K_α 番目で，も早新たな条件が必要でなくなったとする，すなわち

$$\dot{\phi}_\alpha^{K\alpha}(q,\ p,\ t) \equiv 0 \quad \mathrm{mod}(\phi^1,\ \cdots,\ \phi^{K\alpha}) \tag{2.10}$$

のとき，これら拘束条件のもとで(2.6)は積分可能となる．

まとめると，拘束条件として

$$\phi_\alpha^k(q,\ p,\ t) \approx 0 \qquad (k = 1 \sim K_\alpha) \tag{2.11}$$

をえ，(2.11)のもとで，運動方程式(2.6)は解をもつことになる．このことは質点系の運動は，$\phi_\alpha^k = 0$ によってきまる位相空間の中の超曲面上に制限されることを意味するので，いわゆる秩序性が生じたことになる．

ϕ_α^k のうちで，ϕ_α^1 は L の性質(A_{ij} の特異性)のみから現われ，$k \geq 2$ の ϕ_α^k は運動方程式を用いて ϕ_α^1 の定常条件から要請されたものであることに注意しよう．$\phi_\alpha^k(k \geq 2)$をまとめて2次拘束条件（secondary constraint）という．

(2.11) の ϕ_α^k はすべて独立とする．そのうちで ϕ_λ^l がすべての ϕ_α^k に対して

$$\{\phi_\lambda^l,\ \phi_\alpha^k\} \approx 0 \qquad (\equiv 0 \ \mathrm{mod}(\text{全}\ \phi)\ \text{の意味}) \tag{2.12}$$

を充すとき，ϕ_λ^l を第1類（first class）拘束条件といい，そうでないもの（1つでも(2.12)を充さない ϕ_α^k が存在するとき）を第2類（second class）拘束条件という．第1類拘束はゲージ自由度と関連づけられる．第2類拘束は必ず偶数個（$2m$）存在し，その力学系の自由度を m だけ減少させる．ここでは話を簡単にするため，特にことわらない限り第2類拘束のみ存在する力学系を考察することにする．そのような系では H_T の中の v_α は(2.7)～(2.10)の algorithm によってすべて q，p，t の関数として決定される．

以上の拘束系の一般論を用いて，秩序形成の力学模型の構成を試みよう．そのためには，たとえば，時間経過にしたがって，L が特異的となって，拘束条件が現われるか，また

は，1次拘束条件が時間的にあるところに収束すると，それにつれてすべての2次拘束がある状態に収束し秩序が形成されるような L をつくればよい．

いま，時間 t の関数 $\lambda_r(t)$ $(r=1\sim R)$をパラメータ関数として含む $L(q,\ q,\ \lambda(t))$から導かれる Hamiltonian を $H(q,\ p,\ \lambda(t))$とする．ここで

$$\lambda_r(t) \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{2.13}$$

のとき，1次拘束 $\phi_\alpha{}^1(q,\ p)\approx 0$ が出現するならば，$\lambda_r(t)$ 項が外力（外場の源）として働らき，エネルギーを散逸させて秩序が形成されるだろう．あるいは，最初から $\lambda_r(t)$を含む1次拘束が

$$\phi_\alpha{}^1(q,\ p,\ \lambda(t))\approx 0 \tag{2.14}$$

として存在し，$\lambda_r(t)\to 0$ につれて，すべての拘束条件が

$$\phi_\alpha{}^k(q,\ p,\ \lambda)\approx 0 \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} \phi_\alpha{}^k(q,\ p)\approx 0 \tag{2.15}$$

に収束するならば，$\phi_\alpha{}^k=0$ によって与えられる秩序を形成するとみなされる．散逸系の条件は

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\sum\frac{\partial H}{\partial\lambda_r}\dot{\lambda}_r(t)<0 \qquad (H>0\text{ に対し}) \tag{2.16}$$

である．

§Ⅲ　簡単な模型

前節で展開した一般的考察の具体例を提示する．論旨の本質的なところがわかりやすいようにするため，できるだけ単純化したものから始める．

(1)　1つの散逸項ですべての質点が1点に収束する模型．

$$L^{(1)}(q,\ \dot{q},\ \lambda(t))=\lambda(t)\dot{q}_1+\sum_{i=2}^{N}\frac{m_i}{2}\left(\dot{q}_i+\frac{a}{m_i}q_{i-1}\right)^2-\frac{b}{2}q_N{}^2, \tag{3.1}$$

ここに，a，b は定数．$L^{(1)}$ には $(\dot{q}_1)^2$ 項がないことに注意．

このʟ$L^{(1)}$ より p_i は

$$p_1=\lambda(t), \qquad p_i=m_i\dot{q}_i+aq_{i-1}\quad(i=2\sim N). \tag{3.2}$$

よって，A_{ij} の階数が $N-1$ ゆえ1次拘束は唯一つ

$$\phi^1=p_1-\lambda(t)\approx 0. \tag{3.3}$$

そして

$$H_T{}^{(1)}=\sum_{i=2}^{N}\frac{p_i{}^2}{2m_i}-\sum_{i=2}^{N}ap_iq_{i-1}+\frac{b}{2}q_N{}^2+v(p_1-\lambda). \tag{3.4}$$

以下では余分な繁雑さを避けて見易くするために，$a=b=m_i=1$ とする．ϕ^1 の定常

条件から次々に導かれる2次拘束は

$$\phi^2 = \dot{\phi}^1 = -\dot{\lambda}+\{\phi^1,\ H_T\} = -\dot{\lambda}+p_2 \approx 0,$$

$$\phi^3 = \dot{\phi}^2 = -\ddot{\lambda}+p_3 \approx 0,$$

$$\vdots$$

$$\phi^N = \dot{\phi}^{N-1} = -\overset{(N-1)}{\lambda}+p_N \approx 0, \tag{3.5a}$$

$$\phi^{N+1} = \dot{\phi}^N = -\overset{(N)}{\lambda}-q_N \approx 0$$

$$\phi^{N+2} = \dot{\phi}^{N+1} = -\overset{(N+1)}{\lambda}+q_{N-1}-p_N \approx -\overset{(N+1)}{\lambda}-\overset{(N-1)}{\lambda}+q_{N-1} \tag{3.5b}$$

$$\equiv q_{N-1}+O(\lambda) \approx 0,$$

$$\vdots$$

$$\phi^{2N} = \dot{\phi}^{2N-1} = (-1)^N q_1+(-1)^{N-1}p_2+O(\lambda) \approx (-1)^N q_1+O(\lambda) \approx 0,$$

$$\dot{\phi}^{2N} = (-1)^{N+1}v-O(\lambda) \approx 0. \tag{3.5c}$$

ここに $O(\lambda)$ は λ, $\dot{\lambda}$, $\cdots$, $\overset{(2N)}{\lambda}$ の1次結合を表わす．(3.5b) の第3式から第4式への移行は (3.5a) の弱等式を用いた．以下同様．

(3.5c) によって v が λ, $\dot{\lambda}$, $\cdots$, $\overset{(2N)}{\lambda}$ の1次結合として具体的にきまる．

次に $\lambda(t)$ として，たとえば

$$\lambda(t) = e^{-\mu t} \quad (\mu > 0) \tag{3.6}$$

あるいは

$$= (1+t)^{-1}$$

とおくと

$$\lambda,\ \dot{\lambda},\ \cdots,\ \overset{(2N)}{\lambda} \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

よって(3.3)と(3.5)により

$$p_i \to 0, \quad q_i \to 0 \quad (i = 1\sim N), \quad v \to 0 \tag{3.7}$$

をえる．すなわち，任意の初期条件から出発して充分時間が経てば，すべての質点の座標は原点に収束し，そこで静止する．(3.7)の結論は，(3.4)の H_T から導かれる Hamilton 方程式を，$\phi^1 = 0$ の条件で解くことにより直接確めうる．

この例では，(3.1)の $L^{(1)}$ において，$\lambda \dot{q}_1$ 項が散逸項で，q_1 成分のみを通して外力が作用している．2質点(あるいは異る座標成分) 間の相互作用は速度依存ポテンシャル $\dot{q}_i q_{i-1}$ (位相空間では $p_i q_{i-1}$) で，これによって次々に作用が伝わり，q_1 点から系のエネルギーが散逸して最後にすべての座標 q_i は原点に収束するようになっている．

この模型で，ϕ^1 から次々に $\phi^2\cdots\phi^{2N}$ を導く過程から明らかなように，最初に p_1 から $p_2\cdots p_N$ の順で p_i が $O(\lambda)$ で表わされ，その後に q_N から q_1 までが $O(\lambda)$ によって表わされる．したがって，$H_T^{(1)}$ に p_i の多項式 $f(p)$ を加えてもよく，さらに相互作用項も拡張できる．$H_T^{(1)}$ 型の一般型は

$$H_T^{(1)} = \sum_{i=2}^{N}\frac{p_i^2}{2m_i} - \sum_{\substack{i=1\\ j\leq i}}^{N} a_{ij}p_{i-j+1}q_i - \frac{b}{2}q_N^2 + f(p) \tag{3.8}$$

である．a_{ij}，b は定数．

3 次元直交座標系における N 質点系の場合，次のモデルも可能である；

$$q_i = z_i \qquad (i = 1\sim N) \tag{3.9}$$

として，x_i，y_i については拘束条件のない通常の Lagrangian をとって

$$\left.\begin{aligned} L &= L_0(x,\ y,\ \dot{x},\ \dot{y}) + L^{(1)}(z,\ \dot{z},\ \lambda), \\ L_0 &\equiv \sum_{i=1}^{N}\frac{m_i}{2}(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) - V(x,\ y) \end{aligned}\right\} \tag{3.10}$$

とすれば，すべての z_i は

$$z_i \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

よって N 質点は $x-y$ 平面上に集まり，その平面上で運動を続ける．

また(3.1)の $L^{(1)}$ において次の置き換え

$$q_i \to q_i + (i-1)a \quad (a\ \text{定数})$$

を行うと，q_1，q_2，…，q_N は間隔 a の格子点に並んで静止するモデルがえられる．

(2)　2 つの散逸項をもち 1 点に収束する模型．

散逸点を q_1，q_N とし，できるだけ対称的な Hamiltonian を選ぶ．

$$\begin{aligned} H_T^{(2)} &= \sum_{i=2}^{N-1}\frac{1}{2}(p_i - q_i)(p_i - q_{i-1}) + \frac{1}{2}q_N q_{N-1} + v_1(p_1 - \lambda_1(t)) + v_2(p_N - \lambda_2(t)) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=2}^{N-1}[p_i^2 - p_i(q_i + q_{i-1})] + \frac{1}{2}\sum_{i=2}^{N} q_i q_{i-1} + v_1(p_1 - \lambda_1) + v_2(p_N - \lambda_2). \end{aligned} \tag{3.11}$$

拘束条件は

$$\phi_1^1 = p_1 - \lambda_1(t), \qquad \phi_2^1 = p_N - \lambda_2(t). \tag{3.12}$$

定常条件は次の通り．（$\mathrm{d}/\mathrm{d}t = \mathrm{D}$ とする）

$$\dot{\phi}_1^1 = \frac{1}{2}(p_2 - q_2) - \mathrm{D}\lambda_1 \approx 0 \to \phi_1^2 = p_2 - q_2 - 2\mathrm{D}\lambda_1 \approx 0,$$

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_1^2 &= \frac{1}{2}(p_3 - q_3) - \frac{1}{2}(p_2 - q_2) - 2\mathrm{D}^2\lambda_1 \\ &\approx \frac{1}{2}(p_3 - q_3) - \mathrm{D}(1+2\mathrm{D})\lambda_1 \approx 0 \to \phi_1^3 = p_3 - q_3 - 2(1+2\mathrm{D})\mathrm{D}\lambda_1 \approx 0, \end{aligned}$$

$$\cdots\cdots \to \phi_1^{\gamma} = p_\gamma - q_\gamma - 2(1+2\mathrm{D})^{\gamma-2}\mathrm{D}\lambda_1 \approx 0,$$

$$\dot{\phi}_1{}^{N-1} = -\frac{1}{2}(p_{N-1}-q_{N-1})-\frac{1}{2}q_N-2(1+2\mathrm{D})^{N-3}\mathrm{D}^2\lambda_1 \approx 0$$

$$\rightarrow \phi_1{}^N = -q_N-2(1+2\mathrm{D})^{N-2}\mathrm{D}\lambda_1 \approx 0,$$

$$\dot{\phi}_1{}^N = -v_2-2(1+2\mathrm{D})^{N-2}\mathrm{D}^2\lambda_1 \approx 0$$

$$\rightarrow v_2 = -2(1+2\mathrm{D})^{N-2}\mathrm{D}^2\lambda_1 = 0.$$

他方

$$\dot{\phi}_2{}^1 = -\frac{1}{2}q_{N-1}-\mathrm{D}\lambda_2 \rightarrow \phi_2{}^2 = -q_{N-1}-2\mathrm{D}\lambda_2 \approx 0$$

$$\dot{\phi}_2{}^2 = -\frac{1}{2}(p_{N-1}-q_{N-2})-\frac{1}{2}(p_{N-1}-q_{N-1})-2\mathrm{D}^2\lambda_2 \approx 0$$

$$\rightarrow \phi_2{}^3 = p_{N-1}-q_{N-2}+(2\mathrm{D})^2\lambda_2+2(1+2\mathrm{D})^{N-3}\mathrm{D}\lambda_1 \approx 0,$$

$$\cdots\cdots \rightarrow \phi_2{}^\gamma = p_{N+\gamma-2}-q_{N-\gamma+1}+(2\mathrm{D})^2(1-2\mathrm{D})^{\gamma-3}\lambda_2-2\mathrm{D}(1-2\mathrm{D})^{\gamma-3}(1+2\mathrm{D})^{N-3}\lambda_1 \approx 0, \quad (\gamma = 3\sim N)$$

$$\dot{\phi}_2{}^N = -v_1+\frac{1}{2}(2\mathrm{D})^3(1-2\mathrm{D})^{N-3}\lambda_2-\frac{1}{2}(2\mathrm{D})^2(1-2\mathrm{D})^{N-3}(1+2\mathrm{D})^{N-3}\lambda_1 \approx 0.$$

最後の式で v_1 がきまり，拘束条件はこれで終る.

ここで，また，

$$\lambda_\alpha \xrightarrow[t\to\infty]{} 0, \qquad \mathrm{D}^k\lambda_\alpha \rightarrow 0 \quad (\alpha = 1,\ 2)$$

ととれば，各々の拘束条件から

$$\phi_1{}^1 : p_1 \rightarrow 0, \qquad \phi_2{}^1 : p_N \rightarrow 0,$$

$$\phi_1{}^2 : p_2-q_2 \rightarrow 0, \qquad \phi_2{}^2 : q_{N-1} \rightarrow 0,$$

$$\phi_1{}^3 : p_3-q_3 \rightarrow 0, \qquad \phi_2{}^3 : p_{N-1}-q_{N-2} \rightarrow 0,$$

$$\vdots$$

$$\phi_1{}^{N-1} : p_{N-1}-q_{N-1} \rightarrow 0, \qquad \phi_2{}^{N-1} : p_3-q_2 \rightarrow 0,$$

$$\phi_1{}^N : q_N \rightarrow 0, \qquad \phi_2{}^N : p_2-q_1 \rightarrow 0.$$

これらの収束条件を組み合せて

$$\phi_2{}^2 \text{ と } \phi_1{}^{N-1} \Rightarrow p_{N-1} \rightarrow 0,$$

$$p_{N-1} \rightarrow 0 \text{ と } \phi_2{}^3 \Rightarrow q_{N-2} \rightarrow 0,$$

$$q_{N-2} \rightarrow 0 \text{ と } \phi_1{}^{N-2} \Rightarrow p_{N-2} \rightarrow 0,$$

$$p_{N-2} \rightarrow 0 \text{ と } \phi_2{}^4 \Rightarrow q_{N-3} \rightarrow 0,$$

$$\vdots$$

$$q_2 \rightarrow 0 \text{ と } \phi_1{}^2 \Rightarrow p_2 \rightarrow 0,$$

$$p_2 \to 0 \text{ と } \phi_2^N \Rightarrow q_1 \to 0,$$

をえる．結局，すべて $q_i \to 0$, $p_i \to 0$, そして v_1, $v_2 \to 0$ となる．

この $H_T^{(2)}$ を導く Lagrangian は

$$L^{(2)} = \sum p_i \dot{q}_i - H_T = \sum_{i=2}^{N-1} \frac{1}{2}[\dot{q}_i + \frac{1}{2}(q_i + q_{i-1})]^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=2}^{N} q_{i-1}q_i + \lambda_1 \dot{q}_1 + \lambda_2 \dot{q}_N \qquad (3.13)$$

である．

(3) 分子的結合をする模型

(1)で与えた $L^{(1)}$ で記述される2つの系を調和ポテンシャルで結び，$2N$ 自由度の質点系を考える．変数を $q_1 \sim q_N$ と $q_{N+1} \sim q_{2N}$ に2分して

$$\left.\begin{aligned} H_1 &\equiv \sum_{i=2}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} - \sum_{i=2}^{N} a p_i q_{i-1} + v_1(p_1 - \lambda_1), \\ H_2 &\equiv \sum_{i=1}^{N-1} \frac{p_{i+N}^2}{2m_{N+i}} - \sum_{i=1}^{N-1} a p_{N+i} q_{N+i+1} + v_2(p_N - \lambda_2) \end{aligned}\right\} \qquad (3.14)$$

とおき，全 Hamiltonian が

$$H_T^{(3)} = H_1 + H_2 + \frac{b}{2}(q_N - q_{N+1})^2 \qquad (3.15)$$

で与えられるとする．(3.15) は $L^{(1)}$ の中の $bq_N^2/2$ 項を落し，代りに H_1 と H_2 を調和ポテンシャル $b(q_N - q_{N+1})^2/2$ で結合したものである．

この系では1次拘束条件は2つあり

$$\phi_1^1 = p_1 - \lambda_1(t), \qquad \phi_2^1 = p_{2N} - \lambda_2(t). \qquad (3.16)$$

q_1 と q_{2N} が散逸点である．以下では $a = b = m_i = 1$ として単純化する．

これまでと同じく，ϕ_α^1 の定常条件を求めると

$$\begin{aligned}
&\phi_1^2 = \dot{\phi}_1^1 \approx p_2 - O(\lambda_1) \approx 0 && \phi_2^2 = \dot{\phi}_2^1 \approx p_{2N-1} - O(\lambda_2) \approx 0, \\
&\vdots && \vdots \\
&\phi_1^N = \dot{\phi}_1^{N-1} \approx p_N - O(\lambda_1) \approx 0 && \phi_2^N = \dot{\phi}_2^{N-1} \approx p_{N+1} - O(\lambda_2) \approx 0, \\
&\phi_1^{N+1} = \dot{\phi}_1^N \approx -q_N + q_{N+1} - O(\lambda_1) \approx 0, && \phi_2^{N+1} = \dot{\phi}_2^N \approx -\phi_1^{N+1} - O(\lambda_1,\ \lambda_2) \approx 0, \\
&\vdots && \\
&\phi_1^{N+\gamma} \approx (-1)^\gamma (q_{N-\gamma-1} - q_{N+\gamma}) && \phi_2^{N+\gamma} \approx -\phi_1^{N+\gamma} - O(\lambda_1,\ \lambda_2) \approx 0 \\
&\qquad - O(\lambda_1,\ \lambda_2) \approx 0, && (\gamma = 1 \sim N) \\
&\vdots && \\
&\phi_1^{2N} \approx (-1)^N (v_1 - v_2) - O(\lambda_1,\ \lambda_2) \approx 0. &&
\end{aligned}$$

これらの拘束条件から $\lambda_\alpha(t)$, $\dot{\lambda}_\alpha(t)$, $\cdots$, $\overset{2N}{\lambda}_\alpha(t) \to 0$ のとき

$$p_i \to 0, \qquad q_{N-\gamma+1} - q_{N+\gamma} \to 0 \tag{3.17}$$

および

$$v_1 - v_2 \to 0 \tag{3.18}$$

となる．このことは充分時間が経つと，座標対（あるいは粒子対）$q_{N-\gamma+1}$ と $q_{N+\gamma}$ とが一致し，あたかも2原子分子のごとく結合し運動することを意味する．(1)の場合とちがい，q_i は0にならないから2質点が結合したまま運動は続く．実際，

$$p_i = \dot{q}_i + q_{i-1} \qquad (i = 2 \sim 2N-1)$$

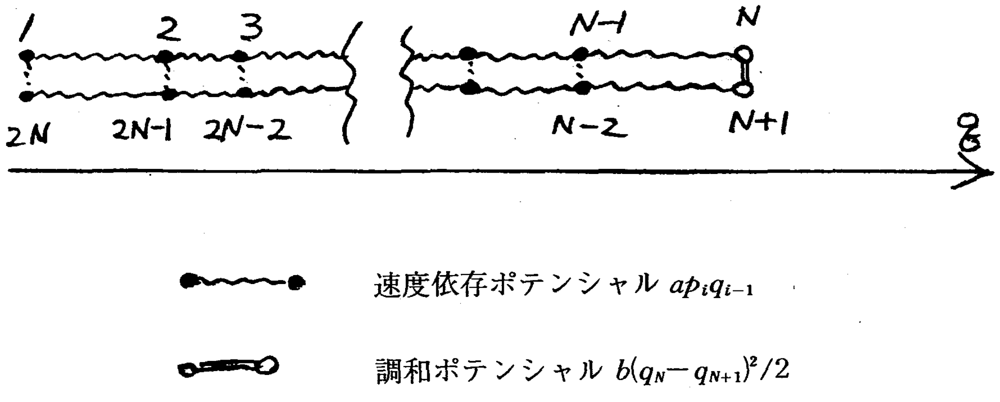
であるから，$p_i \to 0$ でも $\dot{q}_i \neq 0$ である．他方 Hamilton 方程式から

$$\dot{q}_1 \to v_1, \qquad \dot{q}_{2N} \to v_2$$

をえる．(3.18) からわかるように，$v_1 - v_2$ が決定されるだけで，各々の v_α はきまらない．このことは，第2類拘束ばかりでなく，第1類拘束条件が $\phi_\alpha{}^k$ の中にあるということを示している．事実，$\Phi^k \equiv \phi_1{}^k + \phi_2{}^k = p_k + p_{2N-k+1} + O(\lambda_1,\ \lambda_2)$ $(k = 1 \sim 2N)$ はすべての $\phi_\alpha{}^l$ との Poisson の括弧が ≈ 0 である．

第1類拘束が存在するから，この系の $L^{(3)}$ あるいは $H_T{}^{(3)}$ は gauge 変換に対して不変性をもっていることがわかる．その gauge 変換の形を第1類拘束条件から求める一般論はわかっている[2)3)]が，ここでは省略する．

このモデルの面白いところは，座標対 $(q_1,\ q_{2N})$, $(q_2,\ q_{2N-1})$, …, $(q_N,\ q_{N+1})$ の間には最後の対を除いて直接の相互作用がなく，隣接の相互作用を通して間接的にしか相互作用がないにもかかわらず結合状態をつくることである．



3次元運動の場合は，$q_1 \sim q_{2N}$ を3分割して，x_i, y_i, z_i に対応させるか，(3.14) の H_1, H_2 と (3.15) の H_T を x, y, z 成分についてつくり，その和をとればよい．

§IV　まとめ

§IIIの実例は余り realistic でないモデルであるが，解が解析的に求まるので，秩序形成の特徴を把むのに役立つのではないかと思う．

拘束系の力学を秩序形成過程に適用する考え方は，まず拘束条件をその秩序状態を表現するように設定し，それを導くような Hamiltonian（または Lagrangian）が求められるならば，それによって現象論的な有効相互作用が決定されたことになる．その有効相互作用の物理的意味から実体論を構成する手掛りがえられるであろう．したがって，この方法は秩序形成機構の現象論的解明から実体論的解明に役立つと思う．

§IIIの実例は，最初から１次拘束条件がある場合であるが，１次拘束も時間経過のなかで出現するようなモデルができると一層面白い．たとえば $L^{(1)}$ を修正して

$$L=\frac{1}{2}\lambda(t)\dot{q}_1{}^2+\sum_{i=2}^{N}\frac{1}{2}m_i(\dot{q}_i+\frac{a}{m_i}q_{i-1})^2-\frac{b}{2}q_N{}^2 \tag{4.1}$$

とおき，$\lambda(t)\underset{t\to\infty}{\longrightarrow}0$ とすると

$$p_1=\lambda(t)\dot{q}_1\to 0. \tag{4.2}$$

したがって，$t\to\infty$ で１次拘束 $\phi^1=p_1\approx 0$ が現われる．そして

$$H=\frac{p_1{}^2}{2\lambda}+\sum_{i=2}^{N}\frac{p_i{}^2}{2m_i}-\sum ap_iq_{i-1}+\frac{b}{2}q_N{}^2 \tag{4.3}$$

からえられる正準運動方程式は $t\to\infty$ で $H_T{}^{(1)}$ のものに収束しそうに思えるが（4.3）の第１項に $\lambda(t)$ が分母にあるため，無条件ではいかない(*)．すべての q_i が有限という境界条件をつけることができれば，望む結果がえられる．

この報告では主として第２類拘束条件のみ現われる場合を考察したが，第１類拘束のあるモデルでは gauge 自由度を利用し，gauge 固定を外的拘束として持ち込むことができる．その自由度を利用する方法は次の機会にゆづる．

量子化は拘束条件によって制限された位相空間上の力学系の量子化法として Dirac 括弧[1)3)]を利用するのがよいであろう．少くとも第２類拘束条件のみ現われる系では Dirac 括弧を交換子積に置き換えればよい．しかし，第１類も同時に入る場合は，一般的には gauge 固定にかかわる面倒な問題がある．

(*)　これはコンピューターシュミレーションで明らかになった．シュミレーションを行って頂いた横田浩氏に謝意を表します．

参 考 文 献

1) A. M. Dirac, *Lecture Notes on Quantum Mechanics* (Belfer Graduate School, Yeshiva University, New York 1964).

2) R. Sugano, Y. Saito and T. Kimura ; Prog. Theor. Phys. **76** 283(1986).

3) 木村・菅野著『微分形式の解析力学』(マグロウヒル社, 1988).